

STRUCTURE DES MOLECULES

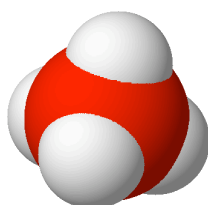
Tout au long de ce chapitre, les notions notées en bleu seront vues ultérieurement.

I - Représentation des Molécules

1 - Modèles à calotte

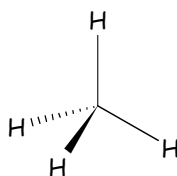
C'est le modèle le plus réaliste.

Exemple : Méthane  $\text{CH}_4$



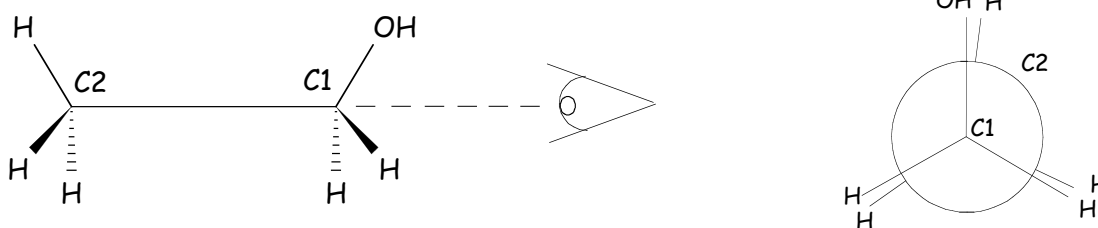
2 - Modèles en perspective

Exemple : Méthane  $\text{CH}_4$



3 - Représentation de Newman

Exemple : Ethanol  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

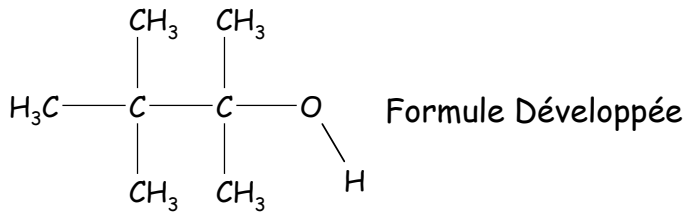


La représentation de Newman permet de représenter la position relative des substituants de deux carbones voisins. Si la liaison  $\text{C}_1\text{C}_2$  est simple ( $\text{C}-\text{C}$ ), alors il existe une libre rotation autour de l'axe  $\text{C}_1\text{C}_2$ .

## 4 - La formule brute, développée et semi développée

Ethanol :  $C_2H_6O$

C'est la comptabilité des atomes.

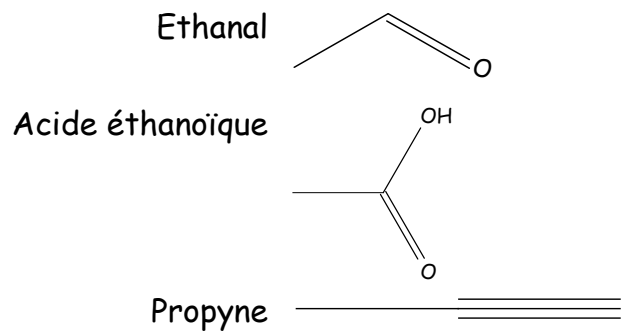
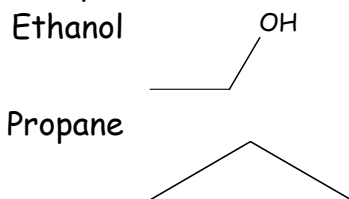


## 5 - La formule en bâtonnets, schématique, en squelette...

Un trait correspond à une liaison C-C.

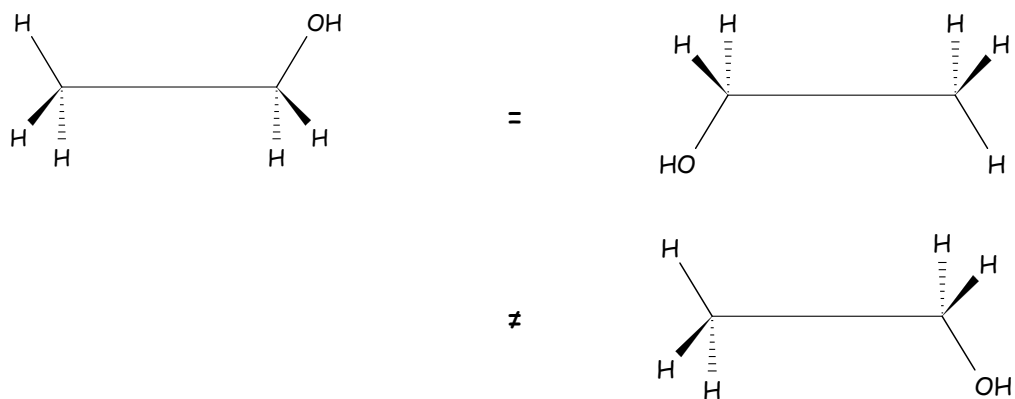
On ne place pas les H des liaisons CH.

Exemples :



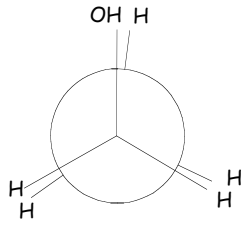
## II - La notion d'Isomérisie

### 1 - Molécules superposables ou identiques

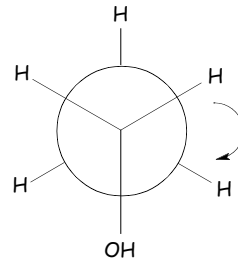


## 2 - Molécules conformères

Deux molécules non superposables sont dites conformères si on peut passer de l'une à l'autre par la libre rotation des liaisons simples.



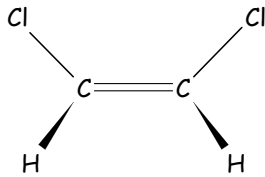
Forme éclipsée



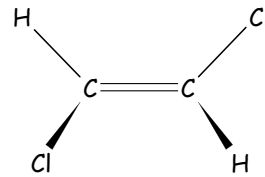
Forme décalée

La température ambiante, autrement dit l'agitation thermique, empêche d'isoler deux conformères. Donc deux conformères représentent la même molécule.

Exemples :

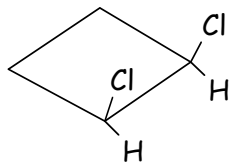


(Z) 1,2-éthène

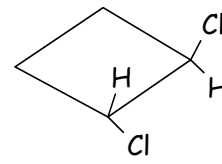


(E) 1,2-éthène

La rotation n'est pas possible à cause de la liaison double : ce ne sont donc pas des conformères.



1(S),2(R) dichloro cyclobutane ou  
CIS 1,2 dichloro cyclobutane



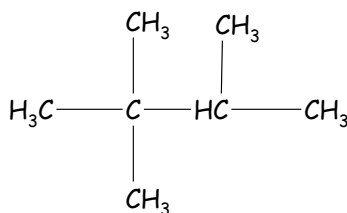
1(R),2(R) dichloro cyclobutane ou  
TRANS 1,2 dichloro cyclobutane

Le cycle empêche la rotation, ce ne sont donc pas des conformères.

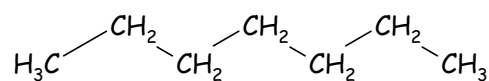
## 3 - Molécules isomères

Deux molécules isomères ont une formule brute identique mais une formule développée différente.

### a - Isoméris de chaîne ou de squelette



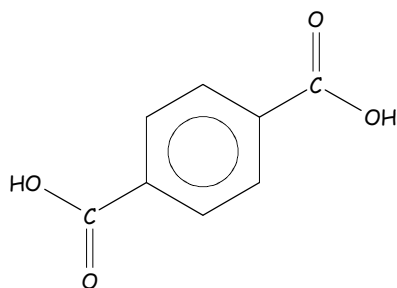
2,2,3-triméthylbutane  
 $T_{eb} \approx 81^{\circ}\text{C}$



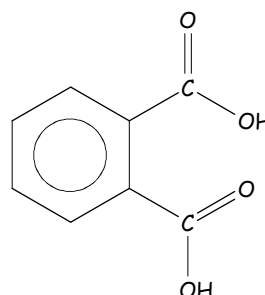
Heptane  
 $T_{eb} \approx 98^{\circ}\text{C}$

La température d'ébullition diminue avec le nombre de ramifications.

## b - Isoméries de position



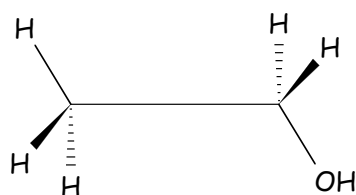
Acide Téréphthalique  
 $T_{eb} \approx 300^{\circ}\text{C}$



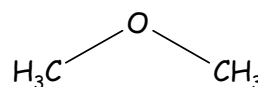
Acide Semi Développée  
 $T_{eb} \approx 230^{\circ}\text{C}$

Les propriétés physiques et chimiques seront proches, mais certains cas présentent des différences notables.

## c - Isoméries de fonction



Ethanol  
 $T_f \approx -117,3^{\circ}\text{C}$   
 $T_{eb} \approx 78^{\circ}\text{C}$



Semi Développée  
 $T_f \approx -141,5^{\circ}\text{C}$   
 $T_{eb} \approx -24,9^{\circ}\text{C}$

## III - Stéréo-isomères

### 1 - Dia stéréo-isomères

La double liaison :

Stéréo-isomère : on ne change que la position dans l'espace des substituants.

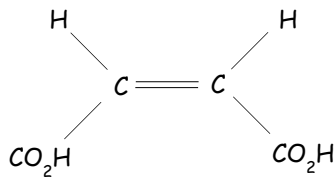
Pour différencier le nom des deux stéréo-isomères, on utilise une nomenclature associée à la double liaison :

- On classe les substituants sur chaque carbone :
  - . Gros « G »
  - . Petit « P »

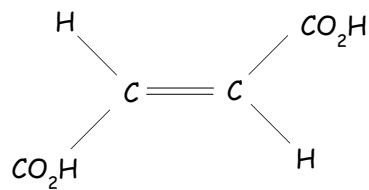
- Le critère de choix pour classer les substituants correspond au numéro atomique. On classe les substituants par ordre de taille décroissante. Là encore, le critère pour les classer correspond au numéro atomique. Lorsqu'il y a égalité de numéro atomique entre des substituants, on regarde le numéro atomique de l'élément attaché à la liaison suivante. De plus, s'il y a des liaisons multiples, elles comptent comme autant de liaisons simples (Liaison double = 2 liaisons simples,...). De là, on peut classer les 2 substituants de chaque carbone : Gros « G » et Petit « P ».

On rajoute ensuite le préfixe suivant selon le type de molécule : Z : Zusammen  
E : Entgegen

Exemple :

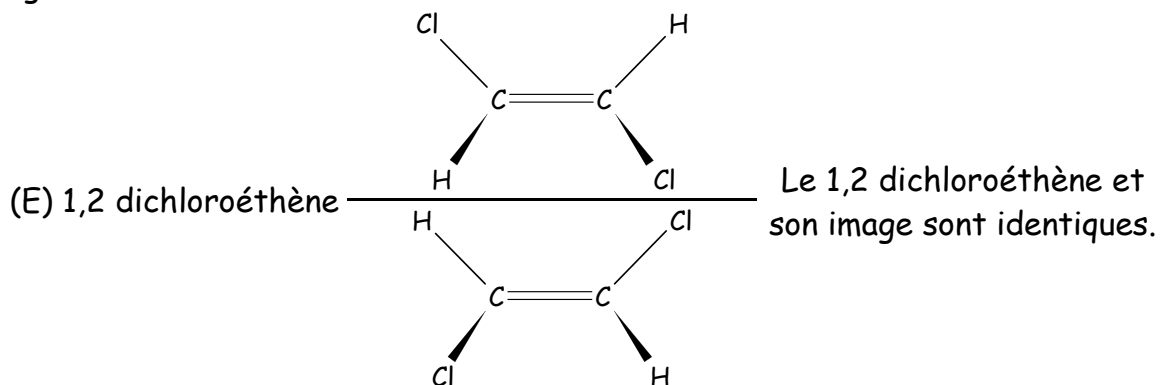


(Z) Acide butènedioïque/Maléique



(E) Acide butènedioïque/Fumérique

Image dans un miroir :



(Z) et (E) séparément sont superposables à leur image.

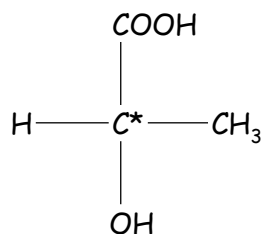
Les stéréo-isomères Z et E sont appelés dia stéréo-isomères.

## 2 - Enantiomères

### a - Présence d'un carbone asymétrique : C\*

Un carbone asymétrique correspond à un carbone tétraédrique (possédant donc 4 liaisons) et qui possède 4 substituants différents.

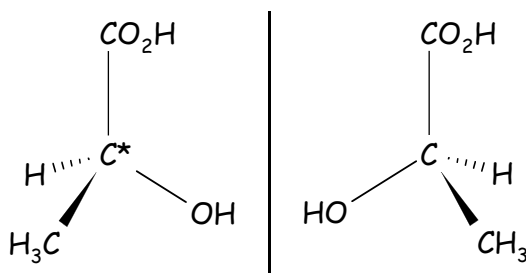
Exemple :



Acide lactique

Acide 2-hydroxypropanoïque

## $\alpha$ - Isomérisation optique



Les deux isomères obtenus ne se superposent pas. On dit qu'on a affaire à deux isomères optiques.

## $\beta$ - Nomenclature associée aux carbones asymétriques.

On parle de la nomenclature *Cahn Ingold Prelog*.

Elle consiste à :

- Classer les substituants par ordre de taille décroissante. Là encore, le critère pour les classer correspond au numéro atomique. Lorsqu'il y a égalité de numéro atomique entre des substituants, on regarde le numéro atomique de l'élément attaché à la liaison suivante. De plus, s'il y a des liaisons multiples, elles comptent comme autant de liaisons simples (Liaison double = 2 liaisons simples,...). De là, on peut classer les 4 substituants : Gros (1), Moyen (2), Petit (3) et Très Petit (4).

- On se place ensuite dans l'axe « C\* - Substituant Très Petit »

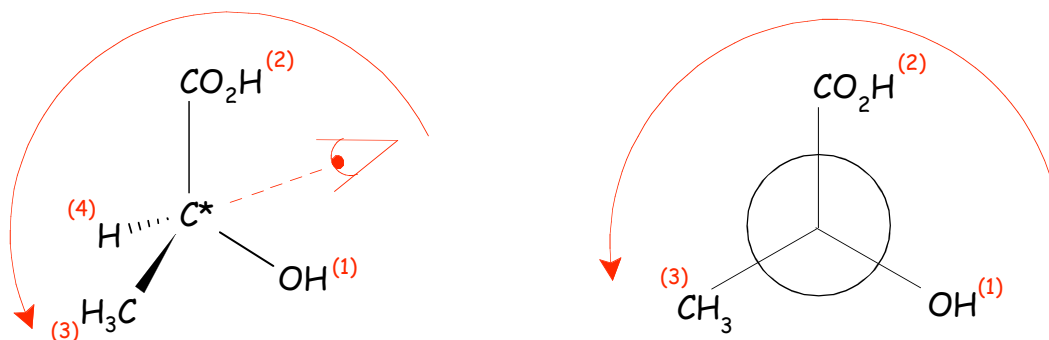
- On parcourt la séquence « Gros - Moyen - Petit » :

- Si la séquence tourne selon le sens des aiguilles d'une montre, on dit que le stéréoisomère est (R), pour *Rectus*.

- si la séquence tourne selon le sens contraire des aiguilles d'une montre, on dit que le stéréoisomère est (S), pour *Sinister*.

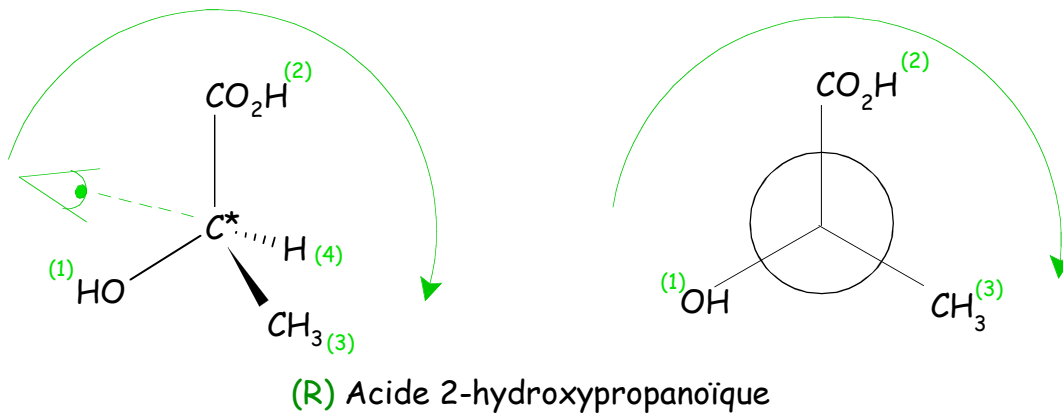
*Exemple :*

Par Newman :



(S) Acide 2-hydroxypropanoïque

Par Newman :



Remarque : Pour passer d'un  $C^*$  (R) à un  $C^*$  (S), il suffit de permuter deux substituants.

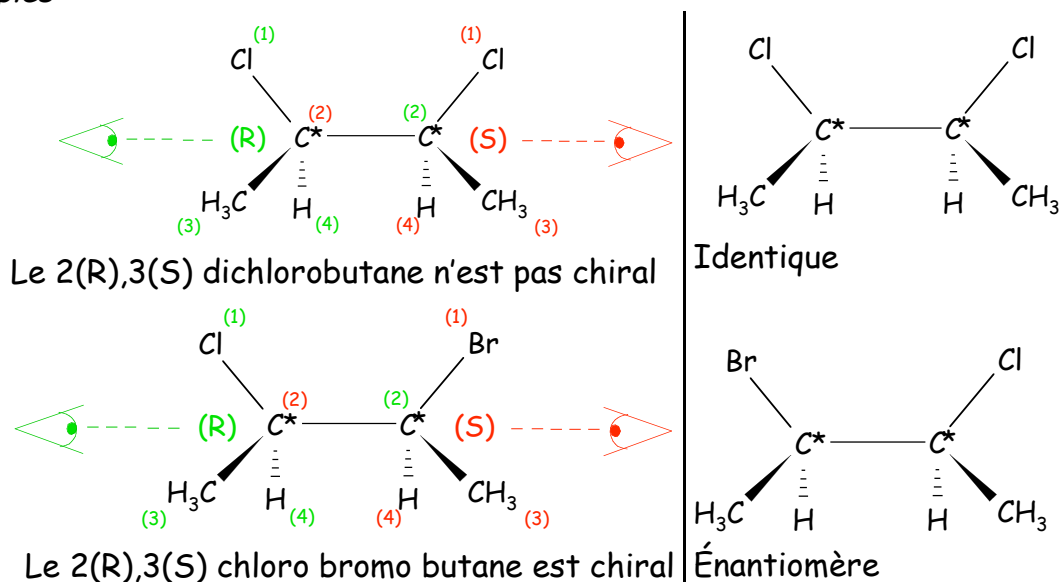
Remarque : On atteint ici un degré de symétrie extrême. Par conséquent, les propriétés physiques et chimiques pour les molécules de ce type seront les mêmes. Les deux stéréo-isomères, images l'un de l'autre dans le miroir (= symétrie optique), sont appelés énantiomères.

## b - Chiralité

Un objet chiral est un objet qui n'est pas superposable à son image dans un miroir. Comment reconnaît-on à l'usage un objet chiral ? Il ne présente ni centre, ni axe de symétrie. Les mains, une clé ou encore une pièce de monnaie sont autant d'objets courants qui sont chiraux.

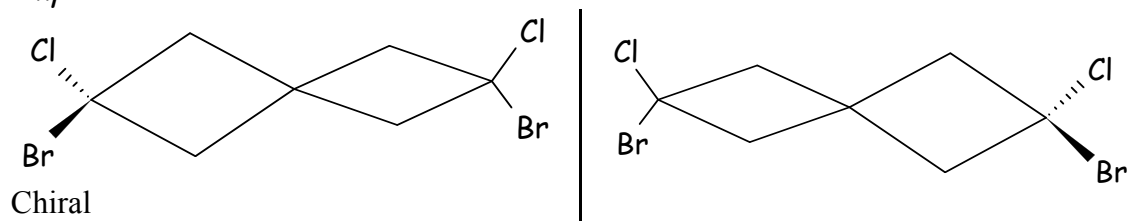
Critère de chiralité en chimie : si une molécule possède un seul carbone asymétrique  $C^*$ , alors la molécule est toujours chirale. Par contre, s'il y a deux carbones asymétriques ou plus, on ne peut pas conclure à l'avance.

Exemples :



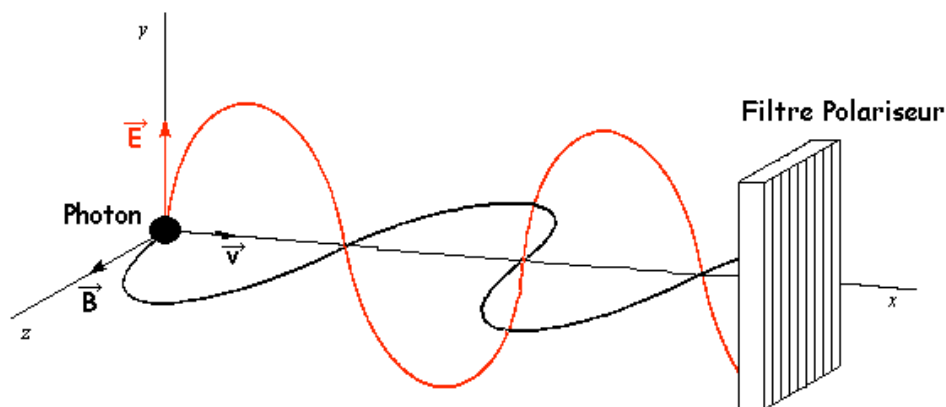
Cependant, une molécule n'a pas forcément besoin de posséder un carbone asymétrique pour être chirale.

Exemple :



### C - Interaction des stéréo-isomères chiraux avec la lumière polarisée

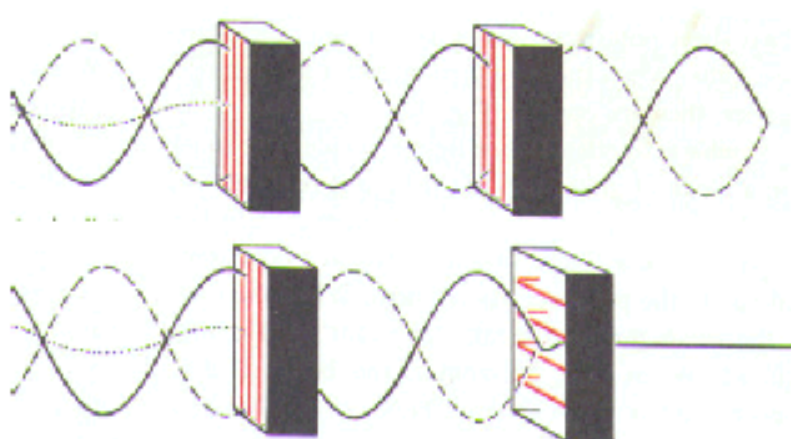
#### $\alpha$ - La lumière polarisée



Au fur et à mesure de la propagation du photon, les deux vecteurs  $\vec{E}$  (Champ Electrique) et  $\vec{B}$  (Induction) changent d'intensité de façon sinusoïdale, mais gardent la même direction.

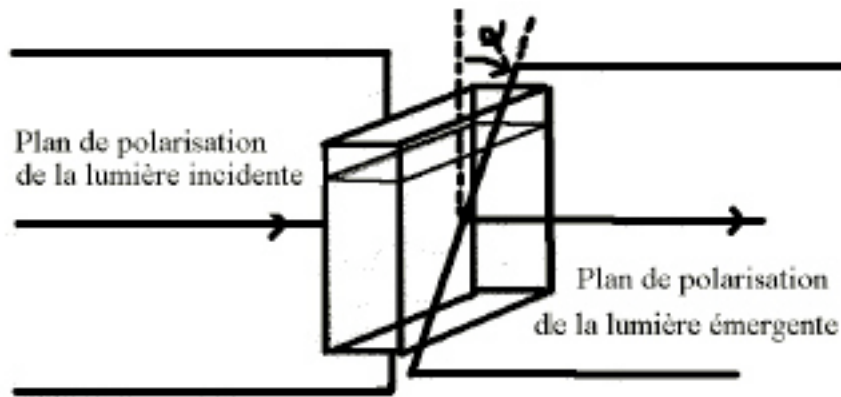
On remarque que le photon et ses caractéristiques  $\vec{v}$ ,  $\vec{E}$  et  $\vec{B}$  font qu'il est chirale.

Le filtre polariseur permet de sélectionner une direction du champ électrique. Ainsi tous les photons qui arrivent au polariseur ressortent tous dans la même direction.





## $\beta$ - Interaction avec une substance chirale



Lorsque la lumière polarisée traverse une substance chirale, on remarque que le plan de polarisation tourne d'un angle  $\alpha$ . On dit que la substance possède une activité optique ou pouvoir rotatoire.

L'angle de rotation  $\alpha$  dépend de façon linéaire

- de la Concentration en espèces chirale  $c_i$ ,
- de la longueur de la cuve  $l$
- du pouvoir rotatoire spécifique de la substance  $[\alpha_i]$  qui dépend de la longueur d'onde, de la nature de la substance, de la température.

Si  $[\alpha_i]$  est positif la substance est dite dextrogyre  $\alpha$  tourne dans le sens des aiguilles d'une montre.

Si  $[\alpha_i]$  est négatif la substance est dite lévogyre  $\alpha$  tourne dans le sens inverse des aiguilles d'une montre

L'angle de rotation du plan de la lumière polarisée traversant une substance  $i$  s'écrit donc ;

$$\alpha_i = [\alpha_i] \cdot l \cdot c_i$$

C'est la loi de Biot, cette loi est additive si la cuve contient plusieurs substances optiquement actives l'angle final de rotation du plan de la lumière polarisée est

$$\alpha = \sum_i \alpha_i$$

On remarquera plus particulièrement qu'une solution contenant en quantité égale deux énantiomères de la même molécule (mélange racémique) a un pouvoir rotatoire nul.

## CONCLUSION

L'organisation spatiale des atomes dans les molécules, nécessite une représentation plus ou moins schématique selon les besoins.

Les ressemblances entre molécules de mêmes formules brutes peuvent être grossières ou très fines le tableau ci-dessous regroupent les liens entre molécules de même formule brute.

